

УДК 519.63

doi 10.26089/NumMet.v19r104

СУПЕРКОМПЬЮТЕРНОЕ МНОГОМАСШТАБНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕЧЕНИЙ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ В МИКРОКАНАЛАХ

В. О. Подрыга¹, С. В. Поляков²

Статья посвящена моделированию течений реальных газов и их смесей в микроканалах технических систем с использованием высокопроизводительных вычислений. Для моделирования используется многомасштабный двухуровневый подход, сочетающий расчеты на макро- и микроуровнях. Подход позволяет исследовать многокомпонентные течения в микроканалах сложной геометрии в широком диапазоне чисел Кнудсена. Параллельная реализация основана на методе разделения областей и функциональном параллелизме и ориентирована на использование вычислительных систем с гибридной архитектурой. В качестве примера рассмотрена задача истечения смеси азота и водорода в вакуум. На этом примере исследована корректность многомасштабного подхода. Кроме того, представлены результаты прямого молекулярно-динамического моделирования течения азота в никелевом микросопле, в том числе характеристика эффективности распараллеливания при большом числе частиц (0.5 млрд) и профили скорости в микросопле в зависимости от времени.

Ключевые слова: многомасштабное моделирование, течение газовой смеси, микроканалы, параллельные алгоритмы, высокопроизводительные вычисления.

1. Введение. Современная вычислительная техника позволяет моделировать очень большие системы и сложные процессы на уровне детализации, который ранее не был доступен. В компьютерных моделях прошлых лет недостаток детализации зачастую восполнялся за счет ввода в модель поправочных коэффициентов, отражавших полученные опытным путем данные. Такой подход применяется и в настоящее время, однако с развитием массивно-параллельных вычислительных систем появляется возможность избавиться от многих ограничений, свойственных упрощенным моделям, и выполнять прямое предсказательное моделирование большой совокупности взаимодействующих нелинейных и разномасштабных процессов. Сказанное имеет прямое отношение к исследованию сложных газодинамических процессов в технических микро- и наносистемах, разрабатываемых с целью внедрения нанотехнологий в промышленности. Особенностью математических задач в указанной области является одновременное изучение процессов на многих масштабах, включая микро- и наноуровни. Одним из современных и активно развивающихся подходов решения таких задач является многомасштабный подход, сочетающий в себе методы механики сплошной среды (МСС) и методы частиц. Такое сочетание позволяет заменить дорогостоящий и трудно реализуемый физический эксперимент компьютерными вычислениями.

В представляемой работе рассматривается один из аспектов моделирования технических микросистем, связанный с расчетами параметров микротечений газов в условиях технического вакуума. Для правильного описания таких процессов необходимо знание свойств реальных газов и воспроизведение их в численном эксперименте. Здесь следует отметить, что отдельные свойства газов хорошо изучены экспериментально в определенных диапазонах температур и давлений и описаны в литературе. Однако имеются свойства, которые можно предсказать лишь теоретически на основе кинетической теории газов [1]. При этом получаемые теоретические данные соответствуют весьма ограниченному диапазону температур и давлений и могут сильно отличаться от реальных свойств газа. Одним из способов получения недостающей информации о свойствах газовой среды в заданном диапазоне температур и давлений является молекулярно-динамическое моделирование [2]. С его помощью можно определять необходимые свойства газов практически из первых принципов.

В настоящей статье рассматривается конкретная задача об истечении сверхзвуковой струи смеси азота и водорода через микросопло в вакуум. Для моделирования процесса используется многомасштабный подход [3, 4], который имеет два уровня детализации, связанных с размерами конкретной геометрии

¹ Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (ИПМ РАН), Миусская пл., 4, 125047, Москва; ст. науч. сотр., e-mail: pvictoria@list.ru

² Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН (ИПМ РАН), Миусская пл., 4, 125047, Москва; зав. сектором, e-mail: polyakov@imamod.ru

задачи (десятки средних длин свободного пробега молекул смеси и более) и расстоянием между взаимодействующими молекулами смеси (порядка 1 нм). Реализация подхода основана на расщеплении по физическим процессам. На макроуровне детализации происходит описание течений многокомпонентных газовых сред. На микроуровне рассчитываются взаимодействия: 1) молекул газа между собой (формирующие уравнение состояния смеси, определяющие транспортные коэффициенты и реализующие перемешивание компонент); 2) молекул газа и атомов твердых поверхностей (описывающие явления в погранслоях). В качестве модели макроуровня используется система квазигазодинамических (КГД) [5] уравнений, в качестве модели микроуровня — метод молекулярной динамики (МД).

Моделирование задач со многими масштабами и уровнями должно происходить согласно определенным правилам. В используемом подходе эти правила тоже имеют место. При этом МД-расчеты можно проводить как прямым образом, сочетая в одной реализации КГД и МД, так и косвенным образом, накопив соответствующую базу данных, рассчитанных заранее. Кроме того, возможно частичное использование базы данных МД и частичное прямое МД-моделирование в сочетании с КГД-расчетами. В итоге, вычислительная технология содержит четыре основных класса алгоритмов, о которых будет написано в разделе 3 нашей статьи.

Основная цель работы состоит в подробном описании деталей алгоритмов, в которых КГД- и МД-модели используются прямым образом, чередуясь на каждом шаге, а также будут описаны их параллельные реализации, результаты расчетов по этим алгоритмам и анализ получаемых расчетных данных. В качестве примера выбрана задача об истечении сверхзвуковой струи смеси азота и водорода в вакуум, для которой имеются необходимые экспериментальные данные.

2. Математическая постановка. В данном разделе рассматривается общая постановка задачи о течении многокомпонентной газовой смеси по микроканалу технической системы. В практической части будут представлены расчеты течения бинарной газовой смеси, состоящей из азота и водорода и истекающей из идеального теплоизолированного сопла цилиндрической геометрии в область технического вакуума. При этом предполагается, что в окружающей среде уже находится небольшое количество этой же смеси при существенно меньшем давлении и при температуре, совпадающей с температурой торможения. Как указывалось выше, в математической модели учтены два основных уровня детализации: макроскопический и микроскопический. Рассмотрим их подробнее.

2.1. Модель макроскопического уровня. Для описания задачи на макроскопическом уровне используются КГД-уравнения. В случае смеси газов система КГД-уравнений записывается для каждого газа отдельно и имеет одинаковый вид [5–7]. Запишем эти уравнения в трехмерном случае для смеси газов в инвариантном относительно системы координат виде в размерных переменных (ниже используется система единиц СИ) вместе с уравнениями связей и состояния:

$$\frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho)} = 0, \tag{1}$$

$$\frac{\partial (\rho_l u_{l,k})}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(\rho u_k)} = S_{l,k}^{(\rho u)}, \quad k = x, y, z, \tag{2}$$

$$\frac{\partial E_l}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{W}_l^{(E)} = S_l^{(E)}, \tag{3}$$

$$E_l = \frac{1}{2} \rho_l |\mathbf{u}_l|^2 + \rho_l \varepsilon_l, \quad \varepsilon_l = c_{v,l} T_l, \quad H_l = \frac{E_l + p_l}{\rho_l}, \quad p_l = Z_l \rho_l R_l T_l, \tag{4}$$

$$\gamma_l = \frac{c_{p,l}}{c_{v,l}}, \quad \operatorname{Pr}_l = \frac{\mu_l c_{p,l}}{\chi_l}, \quad \operatorname{Sc}_l = \frac{\mu_l}{\rho_l D_l}, \quad \operatorname{Ma}_l = \frac{|\mathbf{u}_l|}{a_l}, \quad \operatorname{Re}_l = \frac{\rho_l |\mathbf{u}_l| \lambda_l}{\mu_l}.$$

Здесь все переменные с индексом l относятся к газу типа l , каждая компонента имеет свои числовую плотность (концентрацию) n_l , массовую плотность $\rho_l = m_l n_l$ (m_l — масса молекул газа l). Каждый газ также характеризуется своей температурой T_l и макроскопической скоростью \mathbf{u}_l . Другие параметры компонент смеси: p_l — парциальные давления газов в смеси, E_l , H_l и ε_l — плотности полной энергии, энтальпии и внутренние энергии компонент смеси; $\mu_l = \mu_l(T_l)$, $D_l = D_l(T_l)$, $\chi_l = \chi_l(T_l)$ — кинетические коэффициенты компонент смеси, а именно коэффициенты динамической вязкости, теплопроводности и диффузии. Переменные $Z_l = Z_l(T_l, \rho_l)$, $\gamma_l = \gamma_l(T_l, \rho_l)$, $c_{v,l} = c_{v,l}(T_l)$, $c_{p,l} = c_{p,l}(T_l)$ и $R_l = k_B/m_l$ — коэффициенты сжимаемости, показатели адиабат, удельные теплоемкости и индивидуальные газовые постоянные компонент смеси (k_B — постоянная Больцмана); Pr_l , Sc_l , Ma_l и Re_l — числа Прандтля, Шмидта, Маха и Рейнольдса для компонент смеси; λ_l — средние длины свободного пробега; векторы $\mathbf{W}_l^{(\rho)}$, $\mathbf{W}_l^{(\rho u_k)}$, $\mathbf{W}_l^{(E)}$ с точностью до знака совпадают с потоками плотности соответствующих компонент плотности импульса и плотности энергии. Обменные члены $S_{l,k}^{(\rho u)}$ и $S_l^{(E)}$ учитывают перераспределения импульса и энергии

между компонентами смеси.

Система уравнений (1)–(4) замыкается начальными и граничными условиями. Начальные условия берутся в соответствии с равновесным состоянием газовой среды в отсутствие взаимодействия с внешними факторами. В данной работе рассматривается газовая смесь, изначально покоящаяся во всех точках расчетной области. Граничные условия для КГД-уравнений на стенках микроканала можно задать двумя способами. Первый традиционный способ состоит в задании потоков массовой плотности, плотности импульса и плотности энергии через границу с помощью условий Ньютона. Второй способ состоит в вычислении методом МД нормальных компонент потоков массовой плотности, плотности импульса и плотности энергии вблизи стенок. На свободных поверхностях расчетной области задаются так называемые “мягкие” граничные условия [5].

2.2. Модель микроскопического уровня. В случае, когда на макроуровне рассчитывается течение газовой смеси из N_g компонент, на микроуровне тоже можно ограничиться рассмотрением молекул газа N_g сортов. Однако это справедливо лишь вдали от стенок микроканала. Вблизи стенок следует добавить в рассмотрение частицы (атомы или молекулы), составляющие материал стенок и потенциально способные отрываться от поверхности микроканала. Эволюция исследуемой системы микрочастиц описывается уравнениями Ньютона [2]. Система уравнений движения частиц сорта l , которые могут быть и газом, и металлом, имеет вид

$$m_{l,i} \frac{d\mathbf{v}_{l,i}}{dt} = \mathbf{F}_{l,i}, \quad \mathbf{v}_{l,i} = \frac{d\mathbf{r}_{l,i}}{dt}, \quad i = 1, \dots, N_l,$$

где i — номер частицы, l — тип частиц, N_l — полное число частиц типа l . Частица типа l с номером i имеет свою массу $m_{l,i}$, радиус-вектор $\mathbf{r}_{l,i} = (r_{x,l,i}, r_{y,l,i}, r_{z,l,i})$, вектор скорости $\mathbf{v}_{l,i} = (v_{x,l,i}, v_{y,l,i}, v_{z,l,i})$ и суммарную силу $\mathbf{F}_{l,i} = (F_{x,l,i}, F_{y,l,i}, F_{z,l,i})$, действующую на эту частицу.

Силы представляют собой сумму компоненты взаимодействия i -й частицы с окружающими частицами, зависящей от потенциальной энергии, и компоненты, отвечающей за внешнее воздействие. Потенциальная энергия системы представляется в виде суммы парциальных энергий, вычисление которых происходит по формуле выбранного потенциала взаимодействия:

$$\mathbf{F}_{l,i} = -\frac{\partial U(\mathbf{r}_{l,1}, \dots, \mathbf{r}_{l,N_l})}{\partial \mathbf{r}_{l,i}} + \mathbf{F}_{l,i}^{\text{ext}}, \quad U = \sum U_{ll'}, \quad i = 1, \dots, N_l,$$

где U — суммарная потенциальная энергия, $U_{ll'}$ — потенциал взаимодействия частиц типа l с частицами типа l' и $\mathbf{F}_{l,i}^{\text{ext}}$ — сила взаимодействия с внешней средой.

Выбор потенциала взаимодействия основывается на сравнении механических свойств компьютерной модели потенциала и реального материала.

Начальные условия на микроуровне определяются равновесным или квазиравновесным термодинамическим состоянием системы частиц при заданных температуре, давлении и среднем импульсе. Граничные условия на молекулярном уровне зависят от моделируемой ситуации. Для определения общих свойств среды достаточно рассмотреть выделенный трехмерный ее объем с периодическими граничными условиями по всем координатам. При исследовании микросистем реальной геометрии, таких как микроканал, одно или несколько направлений имеют конечный размер, и сохранение формы объекта достигается подбором потенциала либо фиксацией системы. В этом случае в качестве граничных условий могут использоваться либо зеркальные граничные условия, в этом случае частицы взаимодействуют со своим зеркальным отражением и не выходят вследствие этого за границу, либо условия исчезновения частицы на границе и появления ее в другом месте микросистемы (так, чтобы не нарушалось общее равновесие в системе). Кроме того, может осуществляться как свободный выход частиц на одной стороне выделенного объема и вход потока частиц — на другой. Контроль над температурой системы и над ее полным импульсом осуществляется с помощью алгоритмов термостатирования.

3. Вычислительные алгоритмы и их реализация. Расчет макропараметров по КГД-уравнениям осуществляется при помощи явного по времени сеточного численного алгоритма, имеющего в своей основе метод контрольных объемов на сетках произвольного вида [8, 9]. Для удобства решения задачи в областях сложной геометрии можно использовать гибридные блочные сетки, состоящие из ячеек различной формы и размера. В частности, в двумерном случае можно использовать четырехугольные и треугольные ячейки. В трехмерном случае в качестве ячеек можно использовать многогранники с числом вершин от четырех до восьми. При этом также желательно, чтобы большая часть ячеек была кубами или параллелепипедами. В простых случаях можно использовать декартовы сетки.

Для решения в расчетной области вводится гибридная пространственная сетка и сетка по времени с шагом, который может быть как постоянным, так и переменным. Все параметры компонентов газа (плот-

ности, давления, температуры, компоненты вектора скорости и т.д.) относятся к центрам масс ячеек. Поточковые переменные относятся к центрам граней ячеек. Пространственные аппроксимации основных членов КГД-уравнений выполняются по стандартным методикам (см., например, [10, 11]). Вычислительная схема по времени выбирается явной и двухэтапной (предиктор–корректор).

Система уравнений МД используется в дополнительных вычислениях самостоятельно либо в качестве подсеточного алгоритма, применяющегося внутри каждого контрольного объема. На микроскопическом уровне на каждом шаге моделирования решается система обыкновенных дифференциальных уравнений, соответствующая второму закону Ньютона и описывающая движение частиц молекулярно-динамической системы. Для интегрирования уравнений движений используется схема Верле [12], которая позволяет статистически правильно воспроизводить поведение элементов в течение большого промежутка времени.

Для проведения корректного расчета КГД-модель дополняется реальными уравнениями состояния газа, транспортными коэффициентами и другими сопутствующими параметрами (энтальпия, средние длины пробега и др.), а также реальными граничными условиями. В случае смеси газов необходимо добавить в уравнения для импульса и энергии каждой компоненты соответствующие обменные члены. Вычисление указанных зависимостей, коэффициентов и условий выполняется с помощью методов МД.

Моделирование задач на основе рассматриваемого многомасштабного подхода с двумя уровнями детализации выполняется с помощью специальных алгоритмов, которые в общем виде в зависимости от степени использования микроуровня делятся на четыре класса.

3.1. Классы алгоритмов. Алгоритмы класса 1 предполагают изучение методами молекулярной динамики свойств газовых сред и свойств твердых поверхностей, с которыми контактирует газовая среда в технических приложениях. В качестве численной реализации подхода в этом случае выступает конечно-разностная схема Верле в скоростной форме. С помощью алгоритмов класса 1 осуществляется накопление базы данных молекулярно-динамических расчетов (БДМР) свойств газов и твердых материалов, которая может использоваться в рамках других алгоритмов. Подобные расчеты проводились, например, в работах [13, 14].

Алгоритмы класса 2 предполагают решение задачи только на макроуровне на основе КГД-системы уравнений. При этом свойства компонентов газовой смеси (уравнения состояния по давлению и энергии, кинетические коэффициенты — вязкость и теплопроводность, обменные члены в уравнениях для импульса и энергии, параметры граничных условий) определяются из указанной выше БДМР, накопленной заранее для нужного диапазона температур и давлений. Такие расчеты проводились, например, в работе [15].

Алгоритмы класса 3 предполагают одновременное использование в расчетах КГД-уравнений и уравнений механики Ньютона для молекул газовой среды. Алгоритмы класса 3 реализуются в рамках метода расщепления по физическим процессам. При этом предполагается, что в газовой среде и на ее границах можно ограничиться локальным рассмотрением процессов взаимодействия газов смеси между собой и газов с твердой стенкой. Примеры таких расчетов приведены в работах [4, 16].

Алгоритмы класса 4 тоже предполагают одновременное использование в расчетах КГД-уравнений и уравнений механики Ньютона для молекул газовой среды и атомов поверхностного слоя стенки. Отличием данного случая от предыдущего является то, что в некоторых областях среды (обычно на границе и в зонах сильного перепада параметров газа) молекулярно-динамические расчеты проводятся постоянно без перехода на макроуровень. В этих же областях не используется принцип локальности молекулярных взаимодействий, т.е. в общем случае алгоритмы класса 4 являются нелокальными на молекулярном уровне.

Прямой МД-расчет в рамках алгоритмов классов 3 и 4 представляется наиболее оправданным, поскольку позволяет согласовывать процессы взаимодействия на микро- и макроуровнях. Кроме того, прямой МД-расчет может производиться для конкретного набора физических условий, которые отсутствуют в БДМР и будут отражены в ней в результате данного расчета. Ниже приводится описание алгоритмов классов 3 и 4.

3.2. Реализация алгоритмов классов 3 и 4. Реализация алгоритмов классов 3 и 4 на макро-скопическом уровне опирается на численное решение безразмерных КГД-уравнений (1)–(4). Для этого используется сеточный алгоритм, имеющий в своей основе метод контрольных объемов [8, 9]. В качестве контрольных объемов используются ячейки сетки. Все параметры компонентов газа (плотности, давления, температуры, компоненты вектора скорости и др.) относятся к центрам ячеек. Поточковые переменные задаются в центрах граней ячеек. Пространственные аппроксимации основных членов уравнений в случае гибридных сеток получены по методике, представленной в работе [10]. В случае декартовых сеток используются аппроксимации, аналогичные предложенным в [5]. Вычислительная схема по времени является явной.

Итоговые сеточные уравнения на этапе предиктора не содержат обменных членов и решаются на всей сетке в рамках алгоритмов классов 3 лишь на ее подмножестве в рамках алгоритмов класса 4.

Этап корректора включает в себя использование МД-вычислений и состоит из двух процедур.

Первая процедура касается вычисления параметров обменных слагаемых. В алгоритмах класса 2 она базируется на формулах, где все недостающие для реализации данные берутся либо непосредственно из БДМР, либо интерполируются по полученным предикторным значениям во всех ячейках сетки. В алгоритмах класса 3 и 4 проводятся прямые молекулярные расчеты с шагом $\Delta t_m \ll \Delta t$. При этом осуществляется анализ ситуации в реальном времени, т.е. учитываются соотношения размерных времен: $t_n \Delta t_m$ и $t_n \Delta t$, где $t_n = x_n / u_n$ — нормирующий множитель времени, использующийся на макроскопическом уровне и определяющийся нормировкой x_n пространственной координаты и нормировкой u_n векторов скорости.

Адекватное описание газодинамического процесса в микросистемах в нестационарном случае при наличии перехода в сверхзвуковую область приводит к нормировочным величинам t_n порядка 1 нс и менее. Например, для чистого азота при нормальных условиях скорость звука составляет около 357 мкм/мкс. Тогда при значении x_n порядка 1 мкм получаем время t_n порядка 2.8 нс. Для увеличения устойчивости вычислений величину нормировки скорости обычно повышают в 5–10 раз, что приводит нас к величинам t_n порядка 0.6–0.3 нс. Шаг интегрирования КГД-уравнений в таком случае в размерных переменных составляет сотые или тысячные доли нормировочного времени, т.е. может достигать 0.6–0.3 пс. Размерный шаг интегрирования $t_n \Delta t_m$ в этих расчетах зависит от формы потенциалов взаимодействия частиц газа и обычно выбирается в пределах 1 фс или менее.

На практике, конкретное время МД-вычислений (число подсеточных временных шагов) зависит от качества стартового состояния микросистемы в ячейке (для алгоритмов класса 3) или в домене связанных ячеек (для алгоритмов класса 4). В рассматриваемом подходе считается, что при отсутствии данных в БДМР на старте МД-процедуры в каждой ячейке реализуется квазиравномерное пространственное распределение частиц по ячейке, соответствующее минимальной внутренней энергии их взаимодействия. При этом распределение модуля скорости газовых частиц соответствует локально-максвелловской функции распределения для трехмерного случая, а распределение направлений вектора скорости обеспечивает заданный суммарный импульс. Тогда общее время МД-расчета пропорционально времени максвеллизации рассматриваемой газовой микросреды. Это время может быть достаточно большим и превышать величину $t_n \Delta t_{m, \max}$ в несколько раз. Для устранения этой проблемы предлагается использовать заранее рассчитанные и помещенные в БДМР равновесные состояния микросистем, которые находятся ближе к желаемому состоянию. В рамках реализованного алгоритма время МД-вычислений ограничивается величиной одного газодинамического шага $t_n \Delta t$.

В алгоритмах класса 3 переход к МД-уровню осуществляется следующим образом. Сначала для каждой ячейки сетки определяется микрообъем (в общем случае не совпадает с контрольным объемом), в котором следует произвести МД-вычисления. Следуя соображениям, изложенным в [4], микрообъем должен быть достаточно малым, чтобы вмещать разумное с вычислительной точки зрения число частиц, и достаточно большим, чтобы реализуемая в МД-расчетах статистика была представительной. Было определено эмпирически, что размеры микрообъема для газовой среды должны быть связаны со средней длиной свободного пробега молекул газа λ_m , вычисленной для данной ячейки сетки. Будем считать, что вокруг центра ячейки описан виртуальный куб (или шар) с длиной ребра (диаметром) не менее $0.5\lambda_m$. Фактически, этот куб (шар) является предельным разрешением используемой пространственной сетки. При достижении этого разрешения ячейка сетки и микрообъем должны совпадать. Для более грубой сетки микрообъем будет существенно меньше ячейки сетки.

После определения микрообъема происходит расчет количества частиц каждого сорта, находящихся в нем, а также определяются суммарный импульс и полная энергия, заключенные в данном объеме. Сами МД-расчеты проводятся так же, как и в алгоритмах класса 1. Результатом МД-вычислений являются параметры обменных членов.

В алгоритмах класса 4 часть ячеек постоянно закреплена за молекулярными расчетами (производимыми параллельно с КГД-вычислениями на каждом шаге по времени по формулам (1)–(4)) и не рассматривается на макроскопическом уровне. Как правило, это граничные ячейки сетки. В некоторых случаях к ним добавляются внутренние ячейки, где происходят сильно неравновесные процессы, характеризующиеся большими градиентами газодинамических параметров. Обозначим множество всех таких ячеек через Ω_B (КГД-уравнения в этих ячейках не используются). Остальные ячейки сетки обозначим через Ω_V (в этих ячейках реализуются и КГД-, и МД-вычисления). В итоге сетка представляется в виде объединения двух непересекающихся множеств: $\Omega_V \cup \Omega_B$. Переход к МД-вычислениям в ячейках множества Ω_B осуществляется один раз в начале общего расчета. В ячейках из множества Ω_V переход к

МД-вычислениям осуществляется на каждом шаге по времени и аналогичен соответствующему переходу в алгоритмах класса 3.

Вторая процедура связана с получением корректирующих значений основных газодинамических параметров. В алгоритмах класса 3 такая коррекция используется во всех ячейках сетки, в алгоритмах класса 4 — только в ячейках множества Ω_V . Кроме того, в рамках второй процедуры определяются все параметры смеси.

Описанные выше алгоритмы классов 3 и 4 можно теперь компактно сформулировать в терминах алгоритма класса 4. Иллюстрация этого объединенного алгоритма показана на рис. 1.

Перед началом вычислений строится сетка, разбивающаяся на множества ячеек Ω_V и Ω_B . Затем в ячейках множества Ω_V задается равновесное состояние макросистемы; в ячейках множества Ω_B задается равновесное состояние микросистемы, соответствующее по параметрам равновесному состоянию макросистемы.

Далее на каждом шаге по времени осуществляется двухэтапная процедура. В ячейках множества Ω_V проводится двухуровневый расчет, предполагающий сначала решение КГД-уравнений, а затем коррекцию полученных газодинамических характеристик с помощью МД-вычислений. В ячейках множества Ω_B осуществляется одноуровневый двухэтапный расчет на основе уравнений молекулярной динамики.

На первом этапе в ячейках множества Ω_V по КГД-уравнениям рассчитываются газодинамические переменные, которые передаются в блок МД для расчета обменных членов и пересчета параметров граничных условий на границах множеств Ω_V и Ω_B . В ячейках множества Ω_B производятся расчеты эволюции граничных микросистем, данные которых будут затем формировать параметры условий на границах множеств Ω_B и Ω_V .

На втором этапе в ячейках множеств Ω_V и Ω_B производятся прямые расчеты, которые позволяют получить все газодинамические переменные на макроуровне с учетом всех физических процессов, в том числе газодинамические параметры компонентов и смеси в целом.

Завершается шаг вычислений проверкой критерия останова, который состоит в определении относительных временных производных от массовой плотности и плотности энергии компонентов смеси.

Параллельная реализация алгоритмов классов 1–4 подробно рассмотрена в [17] и более ранних работах. Здесь, однако, следует отметить, что в основе распараллеливания на макроуровне лежит метод статической декомпозиции расчетной сетки на микродомены. Такое разбиение при использовании даже больших конфигураций вычислителей является намеренно избыточным. Именно оно позволяет на различных этапах вычислений выравнивать загрузку процессоров и/или спецвычислителей путем “переброски” части микродоменов с одного вычислителя на другой. При реализации МД-вычислений кроме геометрической декомпозиции используется разбиение по частицам и динамическая балансировка загрузки.

4. Результаты расчетов. В данном разделе рассмотрим результаты расчетов, относящиеся к качеству реализации и оценке эффективности алгоритмов классов 1–4. Расчеты проводились на кластерах и суперкомпьютерах, характеристики которых приведены в табл. 1.

Верификация разработанного численного подхода на макроуровне была выполнена на примере расчетов параметров азот-водородной смеси на выходе из цилиндрического сопла. Эта задача была выбрана в связи с наличием экспериментальных данных, представленных в работе [18]. Геометрия модельной задачи практически совпадает с описанной в [18] (см. рис. 2).

Цилиндрическое микросопло имеет диаметр $D_0 \approx 310$ мкм, длину $L_0 = 6D_0 \approx 1860$ мкм. Оно соединяет баллон с азот-водородной смесью и открытое пространство вакуумной камеры, заполненной изначально той же сильно разреженной смесью. В начальный момент смесь покоится: $u_1 = u_2 = 0$. При

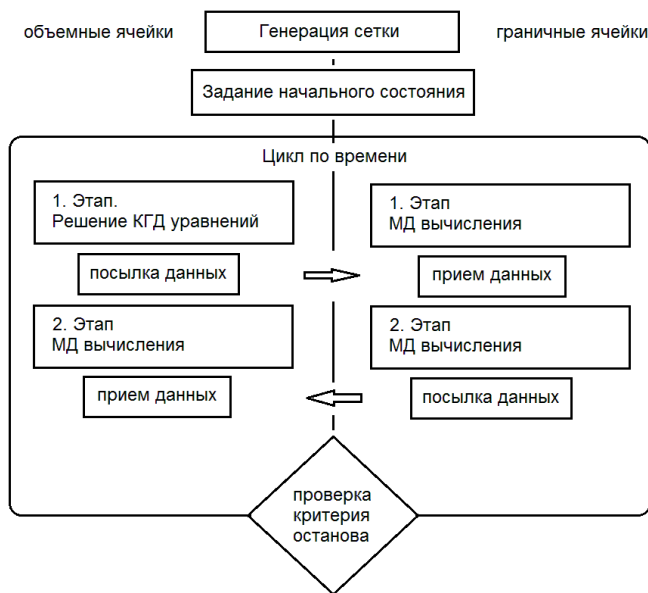


Рис. 1. Иллюстрация общего алгоритма классов 3 и 4

этом в баллоне она находится при стандартных нормальных условиях: $T_1 = 295.15$ К, $p_1 = 101325$ Па; в сопле и вакуумной камере она находится при той же температуре, но при более низких давлениях: $T_2 = 295.15$ К, $p_2 = \delta_0 p_1$, $\delta_0 \approx 10^{-5}$ — параметр откачки. Сопло слева перекрыто перегородкой, которая в начале расчета открывается мгновенно. Внутренняя поверхность сопла считается идеально гладкой и теплоизолированной.

Таблица 1
 Параметры использованных в расчетах компьютерных и суперкомпьютерных систем

Название	Организация	ЧУ	Тип интер-коннекта	Тип процессоров	ПП, ТФлопс	ЧПУ	ЧЯПП	ОЗУ на узле, Гб
IMM6	ИПМ РАН	14	2xGigabit Ethernet	Intel Xeon E5-2650 v0 2.00 GHz; Intel Xeon X5650 2.67 GHz	3.4	2; 2	6/2	64.0; 24.0
K100	ИПМ РАН	64	InfiniBand FDR	CPU Intel Xeon X5670 2.93GHz; GPU NVidia Tesla C2050	107.0	2; 3	6/2; 448	96.0
K60	ИПМ РАН	66	InfiniBand FDR	Intel Xeon E5-2690 v4 2.60 GHz	74.2	2	14/2	256.0
MBC 10П -II	МСЦ РАН	86	Omni Path	Intel Xeon E5-2697A v4 2.60 GHz	110.5	2	16/2	128.0
K1	НИЦЭВТ	36	Ангар-1	Intel Xeon E5-2630 v0 2.30 GHz; Intel Xeon E5-2660 v0 2.20 GHz	14.4	2; 2	6/2 ; 4/2	32.0

Здесь ЧУ — число узлов, ПП — пиковая производительность, ЧПУ — число процессоров на узле, ЧЯПП — число ядер/потоков процессора.

В [17] были приведены результаты расчетов процесса истечения в одно-, двух- и трехмерном случаях, подтверждающие корректность КГД-модели, рассчитываемой по алгоритмам класса 2 с учетом материальных коэффициентов, полученных по алгоритмам класса 1. Здесь добавим данные двумерного расчета на больших временах, рассмотрев эволюцию профиля концентрации азота в случае однокомпонентного течения (рис. 3). Приведенные данные подтверждают устойчивость разработанного численного подхода при использовании реальных материальных коэффициентов и параметров уравнения состояния.

При анализе качества алгоритмов классов 3 и 4 рассмотрим ту же задачу с размерами в 50 раз меньше: $D_0 \approx 6.2$ мкм, длину $L_0 = 6D_0 \approx 37.2$ мкм. Будем рассматривать сетки, исходя из методики, предложенной в [4] и уточненной в [17]. В рассматриваемой задаче имеется два характерных значения давления p_1 и p_2 . Первое из них в случае чистого азота дает примерное значение длины свободного пробега молекул $\lambda_{N_2}^{(1)} \approx 75$ нм, второе — $\lambda_{N_2}^{(2)} \approx 937.56$ мкм. Объем $V_\lambda = \lambda^3$, который можно использовать для МД-вычислений, содержит в первом случае около 10 490 молекул, во втором — 1.64×10^{12} . Анализ этих

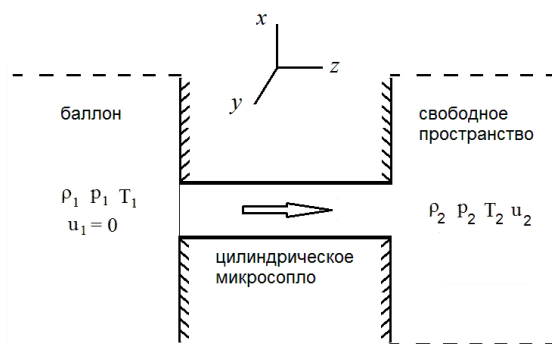


Рис. 2. Геометрия модельной задачи

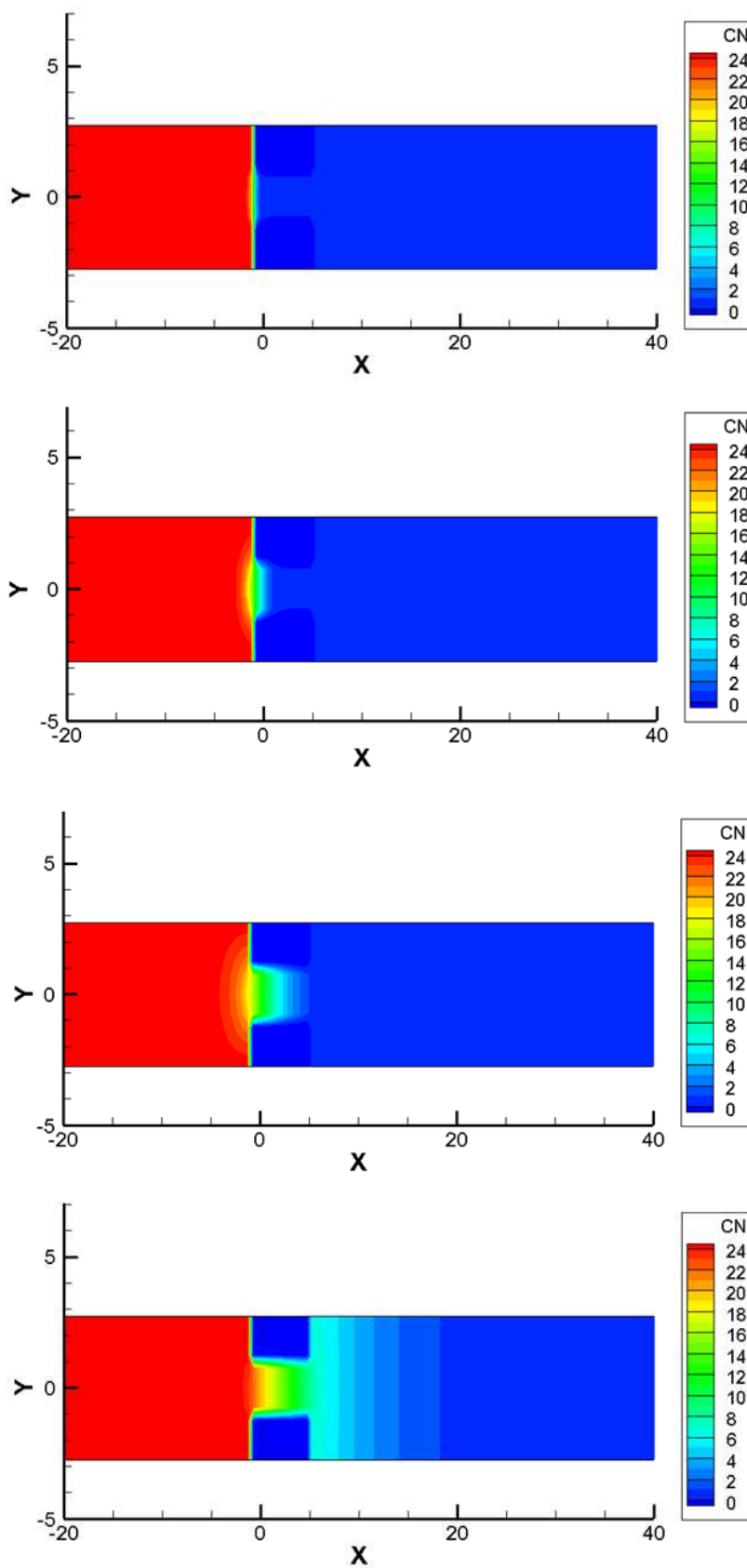


Рис. 3. Распределения профиля концентрации в моменты времени $t = 5.53 \times 10^{k-3}$ мкс, $k = 1, 2, 3, 4$ (сверху вниз)

данных позволяет по минимальному значению λ выбрать предельно малый линейный размер ячейки сетки (в данном случае $h \geq 0.5 \min(\lambda_{N_2}^{(1)}, \lambda_{N_2}^{(2)}) \approx 37.5 \text{ нм} = 0.0375 \text{ мкм}$), а также определить стратегию отбора ячеек, в которых можно использовать МД-вычисления. В частности, эмпирически было выяснено, что если $\lambda = \lambda(p, T) > 1 \div 3h$, то МД-вычисления производить в такой ячейке нецелесообразно (за исключением того случая, когда не используется принцип локальности).

В рассматриваемой задаче с микросоплом при тестировании алгоритмов класса 3 в трехмерном случае была выбрана кубическая сетка с размером ребра $h = 0.62 \text{ мкм}$ (т.е. $0.1D_0$). Общее количество ячеек сетки составило 12.966 млн ячеек. При этом объем V_λ при $p = p_1$ был почти на 3 порядка меньше, чем объем ячейки, и содержал 10.5 тыс. молекул. Такие соотношения размера общей сетки и числа молекул в каждой ячейке привели к следующим вычислительным затратам.

В последовательном одноядерном режиме на корневом узле бюджетного кластера IMM6 один шаг по времени КГД-блока рассчитывался 59.044 сек.; 5000 шагов по времени МД-блока для каждой обрабатываемой ячейки (в которой $\lambda = \lambda(p, T) \leq h$) рассчитывались за 0.005 сек. Поскольку критерий целесообразности МД-вычислений в начале расчетов касается очень малого числа ячеек (порядка 0.5% от всего количества), то на этой стадии МД-вычисления в целом занимали порядка 330–360 сек. При распространении струи газа вдоль оси сопла и далее в открытом пространстве доля ячеек, где проводятся МД-вычисления, постепенно возрастает до 30–40%. Однако при этом в 3–5 раза снижается количество шагов по времени внутри МД-блока. В итоге время работы МД-блока в целом увеличивалось до 15 раз, а максимальный дисбаланс вычислений на основе КГД- и МД-блоков возрастал с 6 до 90 раз.

При распараллеливании задачи на указанной сетке на основе технологии OpenMP на одном узле суперкомпьютера K100 КГД-вычисления, проводившиеся на CPU, удалось ускорить в 8.5 раз (для чего использовались 9 ядер), а МД-вычисления, проводившиеся на GPU, удалось ускорить в 24.5 раз. В итоге дисбаланс между КГД- и МД-блоком в максимуме снизился примерно до 30 раз. Дальнейшее распараллеливание по узлам K100 на основе технологии MPI дисбаланс не изменило, но позволило сократить общее время решения задачи с эффективностью 93–74% на конфигурации узлов 2–12.

При использовании кластеров K1, K60 и MBS10П-II все расчеты проводились на CPU. В этой ситуации за счет увеличения скорости процессоров, большего числа узлов и большего количества ядер вычисления в КГД-блоке удалось ускорить по сравнению с полной конфигурацией бюджетного кластера IMM6 соответственно в 2.5, 12.3 и 17.2 раз. Вычисления МД-блока удалось ускорить соответственно в 3.2, 14.5 и в 19.3 раза за счет большей оперативной памяти узлов и более быстрого обмена по сети.

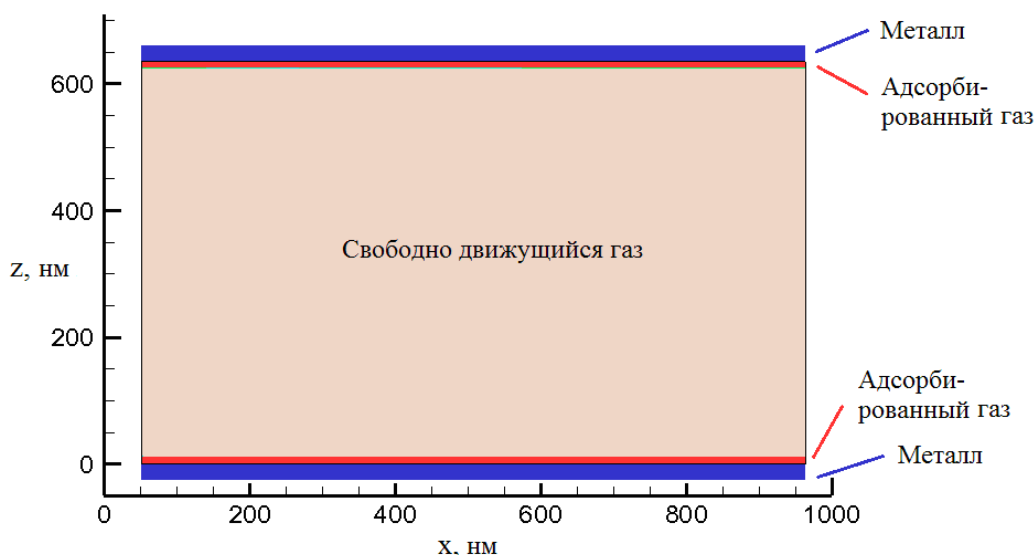


Рис. 4. Геометрия микросопла в разрезе

Еще одна серия расчетов была посвящена прямому МД-моделированию микротечений газа. В качестве примера было рассмотрено течение азота внутри никелевого микросопла. Рассмотренная геометрия содержала две пластинки никеля (снизу и сверху) с налипшими на них слоями адсорбированного азота и свободным слоем азота между ними (рис. 4). Для ускорения расчетов по второму направлению (y) был взят тонкий слой и периодические граничные условия.

Параметры трех рассмотренных микросистем составили:

- 1) размеры нижней и верхней пластин никеля в нанометрах: $1017n \times 101.7 \times 8.5$;
- 2) размеры газовой среды между пластинками в нанометрах: $1017n \times 101.7 \times 614.5$;
- 3) количество атомов никеля в обеих пластинках: $162.57n$ млн;
- 4) количество молекул азота на пластинках и между ними: $42.38n$ млн ($n = 1, 2, 3$).

В проведенных расчетах изучались два вопроса:

- 1) возможности суперкомпьютерного моделирования больших молекулярных систем,
- 2) особенности микротечения в рамках МД-модели.

Относительно первого вопроса отметим, что все расчеты проводились на узлах с центральными процессорами, имеющих большую оперативную память. В качестве суперкомпьютера использовался кластер К60, имеющий максимальную оперативную память на узле. Результаты тестовых расчетов на различных конфигурациях К60 приведены в табл. 2. Лучшие результаты воспроизведены для первой микросистемы в виде зависимостей ускорения и эффективности на рис. 5.

Таблица 2

Параметры и времена расчетов микросистем на различных конфигурациях суперкомпьютера

NSYS	NPART	NPT	NP	NT	PGRID	PМЕМ, Гб	TIME, сек.						
1	165252168	128	128	1	64x2x1	2152.016	158.753						
		256	128	2	64x2x1	2345.462	81.355						
		512	128	4	64x2x1	2278.825	45.690						
		256	256	1	64x4x1	1691.838	97.788						
		512	256	2	64x4x1	2150.915	51.680						
		1024	256	4	64x4x1	1873.990	28.523						
		512	512	1	64x4x2	1485.451	68.857						
		1024	512	2	64x4x2	1952.649	36.581						
		1536	512	4	64x4x2	1694.826	20.378						
		768	768	1	96x4x2	1469.844	59.107						
2	330504336	1024	512	2	128x4x1	8703.582	72.771						
		3072	768	4	96x4x2	3871.953	34.629						
		3072	768	4	96x4x2	1689.622	17.554						
								768	768	1	96x4x2	1940.529	31.791
								1536	768	2	96x4x2	1940.529	31.791
								3072	768	4	96x4x2	1689.622	17.554
								768	768	1	96x4x2	1469.844	59.107
								1536	768	2	96x4x2	1940.529	31.791
								3072	768	4	96x4x2	1689.622	17.554
								768	768	1	96x4x2	1469.844	59.107
1536	768	2	96x4x2	1940.529	31.791								
3072	768	4	96x4x2	1689.622	17.554								
3	495756504	768	768	1	192x4x1	8503.537	176.104						
		3072	768	4	96x4x2	4882.770	53.881						

Здесь NSYS — номер микросистемы, NPART — общее число частиц в микросистеме, NPT=NP*NT — общее число параллельных потоков, NP — общее число MPI-процессов, NT — число тредов на один MPI-процесс, PGRID — параметры решетки MPI-процессов, PМЕМ — средний размер оперативной памяти, необходимой одному MPI-процессу, TIME — время расчета одного временного шага.

Анализ приведенных в табл. 2 и на рис. 5 данных показывает, что расчеты больших микросистем требуют большого количества ОЗУ и занимают очень продолжительное время. Однако при использовании суперкомпьютерных систем типа К60 или более мощных они становятся возможными. На наш взгляд, если моделирование одного шага по времени попадает в диапазон до нескольких десятков секунд, то в целом такой расчет оказывается приемлемым. В противном случае придется ограничиться лишь небольшим начальным этапом развития процесса. Если проанализировать кривую ускорения, то можно увидеть, что, несмотря на небольшую эффективность (порядка 37%), запас параллелизма не заканчивается на 3072 потоках, т.е. возможен еще дополнительный пик ускорения, связанный с попаданием в кэш процессоров при уменьшении размера используемой оперативной памяти за счет увеличения числа процессоров.

Относительно результатов прямого МД-моделирования отметим следующее. В процессе эволюции

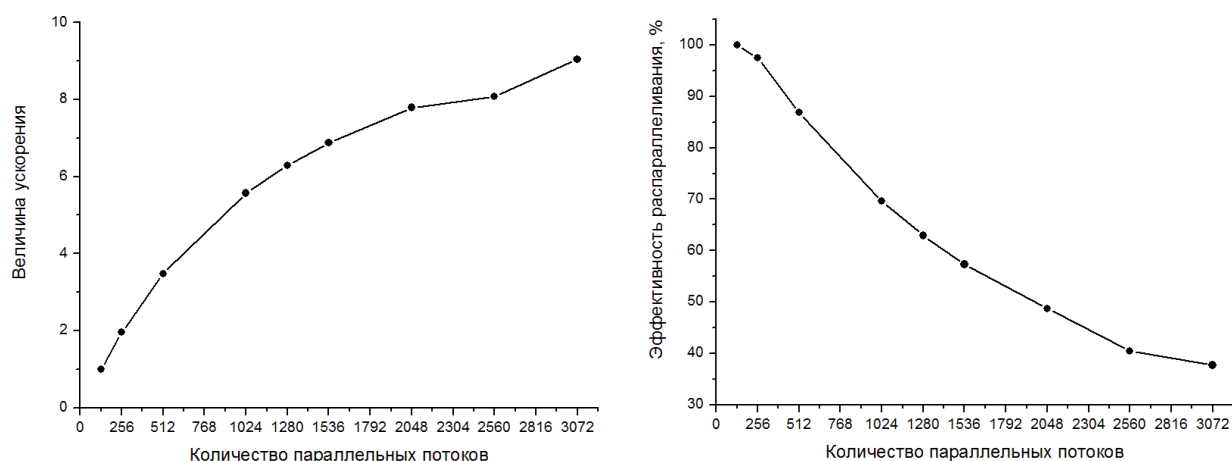


Рис. 5. Ускорение (слева) и эффективность распараллеливания (справа) в зависимости от числа использованных параллельных потоков, полученные для первой микросистемы относительно конфигурации $62 \times 2 \times 1 \times 1$

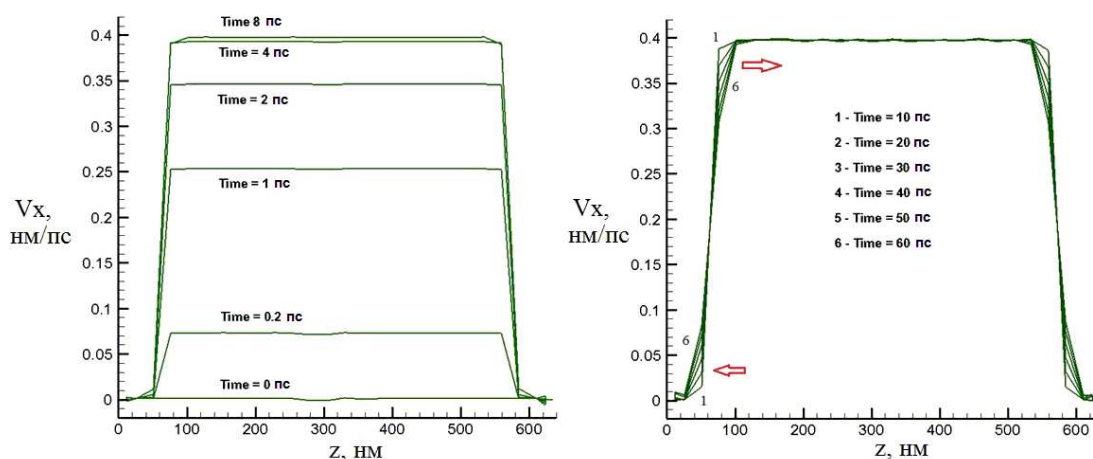


Рис. 6. Эволюция среднего поперечного профиля продольной компоненты скорости

средний поперечный профиль продольной компоненты скорости $\langle v_x \rangle = \frac{1}{L_x} \int v_x dx$ постепенно превращается в профиль Пуазейля (рис. 6). При этом наблюдаются небольшие биения этой величины вблизи стенок канала, связанные с нелинейным взаимодействием газа не столько с металлом, сколько с адсорбированной его частью.

Работа выполнена с использованием вычислительных ресурсов Межведомственного суперкомпьютерного центра Российской академии наук (МСЦ РАН), Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН (ИПМ РАН) и АО «Научно-исследовательский центр электронной вычислительной техники» (НИЦЭВТ).

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 17-01-00973-а, 15-07-06082-а, 16-37-00417-мол-а).

Статья рекомендована к публикации Программным комитетом Международной научной конференции «Суперкомпьютерные дни в России 2017» (<http://russianscdays.org>).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hirschfelder J.O., Curtis C.F., Bird R.B. The molecular theory of gases and liquids. New York: Wiley, 1954.
2. Haile J.M. Molecular dynamics simulation: elementary methods. New York: Wiley, 1992.
3. Подрыга В.О. Многомасштабный подход к трехмерному расчету течений газов и их смесей в микроканалах технических систем // ДАН. 2016. **469**, № 6. 656–658.
4. Подрыга В.О., Поляков С.В. Параллельная реализация многомасштабного подхода для расчета микротечений газа // Вычислительные методы и программирование. 2016. **17**. 147–165.

5. *Елизарова Т.Г.* Квазигазодинамические уравнения и методы расчета вязких течений. М.: Научный мир, 2007.
6. *Шеретов Ю.В.* Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении. Ижевск: Регулярная и хаотическая динамика, 2009.
7. *Елизарова Т.Г., Злотник А.А., Четверушкин Б.Н.* О квазигазо- и гидродинамических уравнениях бинарных смесей газов // ДАН. 2014. **459**, № 4. 395–399.
8. *Eymard R., Gallouet T.R., Herbin R.* The finite volume method // Handbook of Numerical Analysis. Vol. 7. Amsterdam: North Holland, 2000. 713–1020.
9. *Li R., Chen Zh., Wu W.* Generalized difference methods for differential equations: numerical analysis of finite volume methods. New York: Marcel Dekker, 2000.
10. *Попов И.В., Фрязинов И.В.* Метод адаптивной искусственной вязкости численного решения уравнений газовой динамики. М.: Красанд, 2015.
11. *Gautschi W.* Numerical analysis. New York: Birkhäuser, 2012.
12. *Verlet L.* Computer “experiments” on classical fluids. I. Thermodynamical properties of Lennard–Jones molecules // Phys. Rev. 1967. **159**. 98–103.
13. *Подрыга В.О.* Моделирование процесса установления термодинамического равновесия методом молекулярной динамики // Математическое моделирование. 2010. **22**, № 11. 39–48.
14. *Подрыга В.О., Поляков С.В., Пузырьков Д.В.* Суперкомпьютерное молекулярное моделирование термодинамического равновесия в микросистемах газ–металл // Вычислительные методы и программирование. 2015. **16**. 123–138.
15. *Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В.* Моделирование течений газовых смесей в микроканалах // Вестник РУДН. Серия: Математика. Информатика. Физика. 2014. № 3. 154–163.
16. *Карамзин Ю.Н., Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Поляков С.В.* Многомасштабное моделирование нелинейных процессов в технических микросистемах // Математическое моделирование. 2015. **27**, № 7. 65–74.
17. *Подрыга В.О., Поляков С.В.* Многомасштабное моделирование истечения газовой струи в вакуум. Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. № 81. М., 2016.
18. *Ramos A., Tejada G., Fernandez J.M., Montero S.* Nonequilibrium processes in supersonic jets of N₂, H₂, and N₂ + H₂ mixtures: (I) zone of silence // J. Phys. Chem. A. 2009. **113**. 8506–8512.

Поступила в редакцию
30.11.2017

Supercomputer Multiscale Modeling of Gas Mixture Flows in Microchannels

V. O. Podryga¹ and S. V. Polyakov²

¹ *Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences; Miusskaya ploshchad' 4, Moscow, 125047, Russia; Dr. Sci., Senior Scientist, e-mail: pvictoria@list.ru*

² *Keldysh Institute of Applied Mathematics, Russian Academy of Sciences; Miusskaya ploshchad' 4, Moscow, 125047, Russia; Dr. Sci., Senior Scientist, Head of Sector, e-mail: polyakov@imamod.ru*

Received November 30, 2017

Abstract: This paper is devoted to the modeling of flows of real gases and their mixtures in microchannels of technical systems using high-performance computing. For modeling, a multiscale two-level approach is used; it combines calculations at macro- and microlevels. The approach makes it possible to study multicomponent flows in microchannels of complex geometry in a wide range of Knudsen numbers. The parallel implementation is based on the domain decomposition method and the functional parallelism and is oriented on the use of computer systems with hybrid architecture. As an example, the problem of outflow of a nitrogen and hydrogen mixture into vacuum is considered. This example is used to study the correctness of the multiscale approach. In addition, the results of direct molecular-dynamic modeling of nitrogen flow in a nickel micronozzle are discussed, including the parallelization performance at a large number of particles (0.5 billion) and the velocity profiles in a micronozzle as a function of time.

Keywords: multiscale modeling, gas mixture flow, microchannels, parallel algorithms, high-performance computing.

References

1. J. O. Hirschfelder, C. F. Curtis, and R. B. Bird, *The Molecular Theory of Gases and Liquids* (Wiley, New York, 1954).
2. J. M. Haile, *Molecular Dynamics Simulation: Elementary Methods* (Wiley, New York, 1992).
3. V. O. Podryga, "Multiscale Approach to Computation of Three-Dimensional Gas Mixture Flows in Engineering Microchannels," *Dokl. Akad. Nauk* **469** (6), 656–658 (2016) [*Dokl. Math.* **94** (1), 458–460 (2016)].
4. V. O. Podryga and S. V. Polyakov, "Parallel Implementation of Multiscale Approach to the Numerical Study of Gas Microflows," *Vychisl. Metody Programm.* **17**, 147–165 (2016).
5. T. G. Elizarova, *Quasi-Gas Dynamic Equations and Methods for the Computation of Viscous Flow* (Nauchnyi Mir, Moscow, 2007) [in Russian].
6. Yu. V. Sheretov, *Dynamics of Continuum Media under Spatiotemporal Averaging* (Regular and Chaotic Dynamics, Izhevsk, 2009) [in Russian].
7. T. G. Elizarova, A. A. Zlotnik, and B. N. Chetverushkin, "On Quasi-Gasdynamic and Quasi-Hydrodynamic Equations for Binary Gas Mixtures," *Dokl. Akad. Nauk* **459** (4), 395–399 (2014) [*Dokl. Math.* **90** (3), 719–723 (2014)].
8. R. Eymard, T. R. Gallouet, and R. Herbin, "The Finite Volume Method," in *Handbook of Numerical Analysis* (North Holland, Amsterdam, 2000), Vol. 7, pp. 713–1020.
9. R. Li, Zh. Chen, and W. Wu, *Generalized Difference Methods for Differential Equations: Numerical Analysis of Finite Volume Methods* (Marcel Dekker, New York, 2000).
10. I. V. Popov and I. V. Fryazinov, *Adaptive Artificial Viscosity Method for Numerical Solution of Gas Dynamics Equations* (Krasand, Moscow, 2015) [in Russian].
11. W. Gautschi, *Numerical Analysis* (Birkhäuser, New York, 2012).
12. L. Verlet, "Computer 'Experiments' on Classical Fluids. I. Thermodynamical Properties of Lennard–Jones Molecules," *Phys. Rev.* **159**, 98–103 (1967).
13. V. O. Podryga, "Molecular Dynamics Method for Simulation of Thermodynamic Equilibrium," *Mat. Model.* **22** (11), 39–48 (2010) [*Math. Models Comput. Simul.* **3** (3), 382–388 (2011)].
14. V. O. Podryga, S. V. Polyakov, and D. V. Puzyrkov, "Supercomputer Molecular Modeling of Thermodynamic Equilibrium in Gas–Metal Microsystems," *Vychisl. Metody Programm.* **16**, 123–138 (2015).
15. T. A. Kudryashova, V. O. Podryga, and S. V. Polyakov, "Simulation of Gas Mixture Flows in Microchannels," *Vestn. Peoples' Friendship Univ. Ser. Mat. Inf. Phys.*, No. 3, 154–163 (2014).
16. Yu. N. Karamzin, T. A. Kudryashova, V. O. Podryga, and S. V. Polyakov, "Multiscale Simulation of Nonlinear Processes in Technical Microsystems," *Mat. Model.* **27** (7), 65–74 (2015).
17. V. O. Podryga and S. V. Polyakov, *Multiscale Modeling of Gas Jet Outflow to Vacuum*, Preprint No. 81 (Keldysh Inst. Appl. Math., Moscow, 2016).
18. A. Ramos, G. Tejada, J. M. Fernández, and S. Montero, "Nonequilibrium Processes in Supersonic Jets of N_2 , H_2 , and $N_2 + H_2$ Mixtures: (I) Zone of Silence," *J. Phys. Chem. A* **113**, 8506–8512 (2009).